

келя (II) на исходном полимерном носителе. Найдены оптимальные условия их синтеза.

Совокупностью данных элементного анализа и спектральных методов исследования (электронной, ИК-спектроскопии) установлено, что при избытке лиганда формируются комплексы состава $Ni|4N|$ с координацией металла по N_1 и N_5 формазановой цепи, в то время как недостаток лиганда способствует образованию комплексов состава $Ni|3N,O|$, экваториальную плоскость которого образуют один атом кислорода от ОН- или СООН-группы и три атома азота, в том числе от бензтиазольного гетероцикла.

Каталитические свойства синтезированных азот- и кислородсодержащих никельсодержащих мономеров и их твердофазных аналогов изучены в условиях низкотемпературного (0-3°C) и высокотемпературного (до 60°C) катализа в различных окислительно-восстановительных реакциях. Установлено влияние состава координационной сферы никельсодержащих комплексов на их каталитическую активность, рассмотрена возможность циклического использования твердофазных катализаторов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 05-03-32023.

ОБРАЗОВАНИЕ СИЛЬНЫХ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ МЕЖДУ МОЛЕКУЛАМИ И ИОНАМИ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

Бондарев А.А., Смирнов И.В.

Алтайский государственный медицинский университет, Барнаул

Неэмпирические квантово-химические расчеты DFT выполнялись с помощью стандартного пакета программ GAMESS методом B3LYP/6-311G* с обменным функционалом Беке (B3) и корреляционным функционалом Ли, Янга и Пара (LYP). Геометрии рассчитанных молекул были полностью оптимизированы, отсутствие мнимых частот колебаний подтверждало их стационарный характер. Рассчитанные параметры водородной связи в изученных системах, содержащих органические ионы и молекулы представлены в таблице.

Наиболее прочные водородные связи образуются при взаимодействии нейтральных органических молекул с молекулами, содержащими карбоксильный анион. В ряду муравьиной, уксусной и бензойной кислот прочность водородной связи изменяется незначительно.

Если сравнить системы, содержащие этиламин с анилином и этиловый спирт с фенолом, можно отметить что анилин и фенол образуют значительно более прочные водородные связи с карбоксильным анио-

Система	ΔE , кДж/моль	$d, \text{\AA}$	Система	ΔE , кДж/моль	$d, \text{\AA}$
$\text{HCOOH} + \text{HCOO}^-$	-149,60	1,22	Фенол + HCOO^-	-148,65	1,47
$\text{CH}_3\text{COOH} + \text{CH}_3\text{COO}^-$	-139,24	1,22	Фенол + CH_3COO^-	-144,97	1,39
$\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH} + \text{CH}_3\text{COO}^-$	-158,27	1,38	Фенол + Фуран	-32,27	1,84
$\text{CH}_3\text{COOH} + \text{CH}_3\text{COOH}$	-48,17	1,63	Фенол + $\text{C}_2\text{H}_5\text{NH}_3^+$	-95,76	1,63
$\text{C}_2\text{H}_5\text{NH}_2 + \text{CH}_3\text{COO}^-$	-68,25	1,93	Пиридин + CH_3COOH	-74,57	1,63
$\text{C}_2\text{H}_5\text{NH}_2 + \text{CH}_3\text{COOH}$	-75,52	1,63	Фуран + HCOOH	-44,37	1,76
Анилин + CH_3COOH	-56,59	1,75	Пиррол + HCOO^-	-119,17	1,70
Анилин + CH_3COO^-	-111,33	1,73	Пиррол + Фуран	-18,54	2,03
Индол + CH_3COO^-	-139,08	1,62	Фуран + $\text{C}_2\text{H}_5\text{NH}_3^+$	-76,16	1,68
$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{CH}_3\text{COO}^-$	-99,27	1,64	$\text{CH}_3\text{OCH}_3 + \text{CH}_3\text{COOH}$	-62,03	1,63

ном, чем этиламин и этанол, т.е. они более сильные акцепторы водородной связи. Образование сильных водородных связей при взаимодействии анионов с молекулами, содержащими ароматические системы, вероятно связано с тем, что они в большей степени способны распределять избыточный заряд в молекуле за счет эффектов сопряжения, что приводит к значительному снижению энергии системы. Это также характерно и для рассчитанных нами систем, содержащих пиррол и индол, имеющих аномально высокие энергии водородной связи.

N-АЦИЛИРОВАНИЕ ХЛОРАНГИДРИДАМИ ЖИРНЫХ КИСЛОТ (4R)- И (4S)-4-ИЗОПРОПИЛОКСАЗОЛИДИНОВ

Богданова Ю.С., Фефилов Н.Н, Третьяков Н.Ю.

Тюменский государственный университет

Использование хиральных добавок в параллельных химических реакциях во многом схожи с использованием защитных групп: эта группа